



TITLE:

平衡状態の分布関数を導出する新たな逐次近似法

AUTHOR(S):

立川, 崇之

CITATION:

立川, 崇之. 平衡状態の分布関数を導出する新たな逐次近似法. 物性研究
2007, 87(4): 510-534

ISSUE DATE:

2007-01-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/110758>

RIGHT:

平衡状態の分布関数を導出する新たな逐次近似法¹

工学院大学技術者能力開発センター (CPD センター) 立川 崇之²

(2006 年 10 月 30 日受理)

ハミルトン系において、ミクロカノニカル分布のもとで平衡状態の一点分布関数を導出する際、一般に Lane-Emden タイプの積分方程式を解かなければならない。この積分方程式を解く際には、分布関数としてまずテスト関数を式の一方に代入し、得られた関数を新たにテスト関数として用いて収束するまで繰り返す、逐次近似法がよく用いられてきた。ところがこの逐次近似法では収束が遅いだけでなく、関数の収束が保証されていない。そこで我々は新たな逐次近似法を導出した。この方法では逐次計算の繰り返しによるエントロピーの収束が数学的に保証されており、また従来のものに比べて高速に分布関数が導出出来る。相転移点付近でも十分に使えるものであり、ハミルトン系での安定、準安定な平衡状態を表す分布関数を導出する方法として、幅広い応用が期待出来る。

1 はじめに

物理系において、様々な初期条件が与えられたとしても、十分に長い時間が経過すると系は進化、緩和し、平衡状態に達すると考えられる。平衡状態はごく少数の物理量で系の性質が記述出来る状況であり、熱力学、統計力学では長年扱われてきた。系が多数の質点から成り立つ多体系においても、質点は互いの相互作用により系が進化、緩和し、最終的には平衡状態に達すると考えられる。

それでは安定な平衡状態において、質量分布はどのようになるだろうか。また、熱力学的性質はどのようになるだろうか。多体系のシミュレーションから熱力学的性質を見いだす事も考えられるが、自己重力系のような長距離力系では、緩和時間が非常に長いことが知られている [2, 3, 4]。緩和時間が非常に長い上に、多体系のシミュレーションでは系が準安定状態にしばらくの間とどまり、そこから徐々に安定状態に移行していくことが知られている [4]。このため、シミュレーションからでは熱力学的性質を見いだす事は難しい。

平衡状態においてはエントロピーが最大となるので、最大エントロピーを与える分布関数を求めることとなる。この問題は、系の全エネルギーと全質量が保存されるミクロカノニカル分布において考えると、エネルギーと質量を拘束条件とした変分問題を解くことになる。Lagrange の未

¹この原稿は、[1] で提案した逐次近似法を拡張したものの解説である。

²E-mail: tatekawa@cpd.kogakuin.ac.jp

定乗数法を用いて変分問題を考えると、形式的には分布関数を与えられる。しかし変分問題から形式的に与えられた分布関数は、内部にハミルトニアンを含む形で記述される。ハミルトニアンには分布関数に依存するポテンシャルエネルギーの項が含まれるため、具体的に分布関数を記述するには、Lane-Emden タイプの積分方程式を解かなければならない。

一般的な相互作用を考えた場合、Lane-Emden タイプの積分方程式は解析的に解くことが出来ない。そこで積分方程式を解くために、しばしば逐次近似法が用いられてきた。テスト関数としてまず拘束条件を満たすような分布関数を積分方程式の被積分関数として与える。得られた分布関数は真の解に近づいていると期待して、改めてテスト関数と看做して被積分関数とする。この繰り返しによる計算で、分布関数が真の解に収束するまで繰り返す。ところがこの方法では分布関数の収束性が保証されていないため、逐次近似の計算の末に解が得られるとは限らない。また、特に相転移点付近の解析を行いたい場合には、揺らぎが大きすぎて収束が非常に遅いと考えられる。

そこで我々は、平衡状態の分布関数を導出する、新たな逐次近似法を提案した。ミクロカノニカル分布のもとでは系の全質量と全エネルギーが保存されるという拘束条件が課される。このうち、全エネルギーは分布関数に対して非線形の関数になっている。我々の方法ではエネルギーの拘束条件を分布関数に対して線形化し、不等式で与えられるような拘束条件に置き換えた。この方法では、逐次近似の各段階において系の全エントロピーが単調増加しながら収束する。これに伴い、系の全エネルギーも各段階では厳密には保存しないが、最終的には拘束条件で与えた値に収束する。分布関数そのものの収束は保証されていないが、我々のいくつかの解析では、数回から数十回の逐次計算で、解析に十分な範囲内の誤差にとどまるように分布関数が収束する事が確かめられている。

分布関数が一意に収束しない事から逆に、あるエネルギーのもとでの系の分布関数の導出を試みると、最初に与えるテスト関数に依っては、複数の解に収束する事がある。この事は安定な平衡状態だけではなく、準安定な平衡状態を与えている。準安定な平衡状態はわずかな揺らぎには安定であるが、揺らぎが大きいと平衡点に復元出来ないという、解析が難しい状態である。我々が提案する逐次近似法を注意深く使用する事により、準安定な平衡状態の分布関数を導出する事も可能である。

我々が提案する分布関数の新たな導出法は、任意次元の空間のモデルで定式化がなされている。特にモデルが平均場で厳密に記述出来る場合や、モデルに周期的境界条件が与えられている場合には、高速に計算を進める手法を見いだしている。この方法はハミルトン系での安定、準安定な平衡状態を表す分布関数を導出する方法として、幅広い応用が期待出来ると考えられる。

2章以降の構成は以下の通りである。まず2章ではミクロカノニカル分布のもとで、平衡状態の分布関数がどのような形になるかを、Lagrange の未定乗数を用いた変分問題から導出する。導出された分布関数を具体的に書き下すには、積分方程式を解く必要がある。そこで3章では、逐次近似を用いた解法を示す。3.1 で従来の方法とその問題点を述べ、3.2 で我々が開発した方法を説明する。3.3 では我々が開発した方法を具体的に計算するための手順を示す。そして3.4 で実際にこの新しい方法が有用である事を実証する。

だが単純に計算すると、空間次元を上げた場合には計算量が膨大になるので、4章では計算を高速化する手法を解説する。4.1 は平均場でモデルが厳密に記述出来る場合、4.2 は周期的境界条件が与えられる場合である。

オリジナルの論文では空間一次元モデルの解析のみを行った。そこで5章では空間二次元の場合にも新しい方法が問題なく適用出来る事を示す。最後に6章でまとめと今後の発展について論ずる。Appendix では、新しい方法の数学的背景を述べる。

2 平衡状態の分布関数

まずは復習として、ミクロカノニカル分布のもとでの、平衡状態の分布関数を導出する。今後の議論は一般の d 次元系で行うものとする。

等質量の粒子からなる多体系のハミルトニアンは以下の形で与えられるとする。

$$H = \sum_i \frac{\mathbf{p}_i^2}{2} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} m^2 V(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j). \quad (1)$$

m は粒子の質量、 \mathbf{x}_i と \mathbf{p}_i はそれぞれ粒子 i の位置と運動量を表す。 $V(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)$ は粒子間の相互作用を表すポテンシャルで、粒子間の距離に依存するものとする。

粒子の質量密度を一定に保ったまま、粒子数 $N \rightarrow \infty$ の連続極限をとり、物質の一点分布関数 $f(\mathbf{p}, \mathbf{x})$ を考える。 $f(\mathbf{p}, \mathbf{x}) d\mathbf{x} d\mathbf{p}$ は相空間の微小領域に存在する粒子の数密度を表す。系のポテンシャルエネルギーは、一点分布関数 f を用いて次のように表される。

$$\begin{aligned} \Phi[f] &= \frac{1}{2} \int d\mathbf{x} d\mathbf{x}' d\mathbf{p} d\mathbf{p}' f(\mathbf{p}, \mathbf{x}) V(\mathbf{x} - \mathbf{x}') f(\mathbf{p}', \mathbf{x}') \\ &= \frac{1}{2} \int d\mathbf{x} d\mathbf{x}' \rho(\mathbf{x}) \rho(\mathbf{x}') V(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \end{aligned} \quad (2)$$

$\rho(\mathbf{x})$ は質量密度を表し、

$$\rho(\mathbf{x}) = \int d\mathbf{p} f(\mathbf{p}, \mathbf{x}), \quad (3)$$

と表される。一方、運動エネルギーは

$$K[f] = \frac{1}{2} \int d\mathbf{x} d\mathbf{p} \mathbf{p}^2 f(\mathbf{p}, \mathbf{x}), \quad (4)$$

となり、系の全エネルギーは

$$E[f] = K[f] + \Phi[f], \quad (5)$$

となる。

平衡状態とは、Boltzmann-Gibbs エントロピー

$$S[f] = - \int d\mathbf{x} d\mathbf{p} f \log f, \quad (6)$$

が最大になる時であるとする．この時の分布関数をミクロカノニカル分布，すなわち全エネルギー，全運動量，全質量が保存するという条件のもとで導出する．拘束条件は全エネルギー $E[f] = U$ ，全質量

$$M[f] = \int \rho \, dx = 1, \quad (7)$$

および全運動量

$$P[f] = \int \mathbf{p} f(\mathbf{p}, \mathbf{x}) \, dx \, d\mathbf{p} \quad (8)$$

である．以後，全運動量は 0 とする．また，一般には角運動量も保存して拘束条件に加える事が考えられるが，ここでは角運動量もゼロであるとする．

エントロピーが最大となる分布関数を得るため，Lagrange の未定乗数法を用いる．

$$F[f] \equiv S[f] - \beta E[f] - \alpha \int f \, d\mathbf{p} \, dx, \quad (9)$$

α, β は Lagrange の未定乗数である．分布関数に関して変分を取り，汎関数 F の変分が 0 になる分布関数を求める．

$$\frac{\delta F[f]}{\delta f} = -\log f - 1 - \beta \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2} + W(\mathbf{x}) \right) - \alpha = 0. \quad (10)$$

ここで導入した関数 $W(\mathbf{x})$ は点 \mathbf{x} に置かれた単位質量の質点を受けるポテンシャルで，次のように定義される．

$$W(\mathbf{x}) \equiv \int \rho(\mathbf{x}') V(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \, d\mathbf{x}'. \quad (11)$$

式 (10) を解くと，規格化された分布関数は次のように書かれる．

$$f(\mathbf{p}, \mathbf{x}) = A \exp \left[-\beta \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2} + W(\mathbf{x}) \right) \right]. \quad (12)$$

規格化定数 A は $A = \exp(-\alpha - 1)$ である．この分布関数を用いて，質量密度が得られる．

$$\rho(\mathbf{x}) = \tilde{A} \exp[-\beta W(\mathbf{x})]. \quad (13)$$

ここで \tilde{A} は空間次元 d に依存し，

$$\tilde{A} = A \left(\frac{2\pi}{\beta} \right)^{d/2}, \quad (14)$$

である．

式 (11) と (13) を組み合わせることにより，Lane-Emden タイプの閉じた式を得ることが出来る．

$$W(\mathbf{x}) = \tilde{A} \int \exp[-\beta W(\mathbf{x}')] V(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \, d\mathbf{x}', \quad (15)$$

あるいは

$$\rho(\mathbf{x}) = \tilde{A} \exp \left[-\beta \int \rho(\mathbf{x}') V(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \, d\mathbf{x}' \right], \quad (16)$$

である．

平衡状態の分布関数を具体的に記述するには，積分方程式 (15) あるいは (16) について解かなければならない．次の章ではこの積分方程式を解くための従来の方法と，我々が開発した方法の

詳細について述べる．関数 W が具体的に求まれば，(12) から一点分布関数 f が得られる．また (16) を解く事から，質量密度分布 ρ が直接求まる．ポテンシャルエネルギーと運動エネルギーは，(2) と (4) からそれぞれ求まる．系の温度 T は，Lagrange の未定乗数 β の逆数で与えられる ($T = \beta^{-1}$)．また，温度と運動エネルギーの間には以下の関係がある．

$$T = \frac{1}{\beta} = \frac{2}{d} K. \quad (17)$$

ここから β は，

$$\beta = \frac{d}{2} (U - \Phi), \quad (18)$$

とも表される．

3 一点分布関数の導出法

3.1 従来から用いられてきた方法

前述のように Lane-Emden タイプの方程式は積分方程式であるので，解く方法に工夫が必要である．3次元 Newton 重力の場合には Poisson 方程式と連立させて解く事が出来，特に球対称を課した場合には微分方程式に置き換えることが可能である [3]．また，粒子が一次元系の円環に固定された HMF モデルでは，(16) の右辺の積分をうまく解析的に扱うことが出来，容易に解く事が出来た [4]．

だが一般には，積分方程式をどうにかして解かなければならない．そこで逐次近似の方法を用いて分布関数を求めることを試みる．ここでは質量密度 $\rho(\mathbf{x})$ を求めることを考える．

従来の方法では，以下のような手順で式 (16) が解かれていた．

1. まずテストとして質量密度 $\rho_0(\mathbf{x})$ を考える． ρ_0 は質量保存を満たしているとする．また，質量密度は式 (13) で表されるように， $\tilde{A}, \beta, W(\mathbf{x})$ を用いて表されるものである．
2. ρ_0 を用いて，(11) から $W_0(\mathbf{x})$ を次のように求める．

$$W_0(\mathbf{x}) = \int \rho_0(\mathbf{x}) V(\mathbf{x} - \mathbf{x}') d\mathbf{x}', \quad (19)$$

3. エネルギー保存 (18) から，

$$\beta_0 = \frac{d}{2} \left(U - \frac{1}{2} \int d\mathbf{x} d\mathbf{x}' \rho_0(\mathbf{x}) \rho_0(\mathbf{x}') V(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \right), \quad (20)$$

で β_0 を求める．

4. 式 (16) から

$$\rho_1(\mathbf{x}) = \tilde{A}_1 \exp \left[-\beta_0 \int \rho_0(\mathbf{x}) V(\mathbf{x} - \mathbf{x}') d\mathbf{x}' \right], \quad (21)$$

を用いて $\rho_1(\mathbf{x})$ を求める．この右辺に現れる \tilde{A}_1 は， $\rho_1(\mathbf{x})$ の規格化から決定される．

この操作を繰り返し、 k 回目の計算で得られた $\rho_k(\mathbf{x})$ を用いて、 $\rho_{k+1}(\mathbf{x})$ を求めていく。繰り返しによって $\rho_k(\mathbf{x})$ が収束すれば、それが平衡状態の質量密度である。

しかしこの方法で解の導出を試みると、うまく行かないことがある。逐次計算によって解の収束を期待する訳だが、解が収束する保証がない。そのため、特に相転移点付近でこの方法を用いると、いくら計算を繰り返しても解が収束しないという恐れがある。また、 β は運動エネルギーとの対応から非負である量である。ところが、この方法で計算を行うと β が負になるような解に収束することが起きうる。

上記の問題のため、相転移点付近での平衡解の導出においては、詳細な解析が非常に困難であった。

3.2 新しい逐次近似法

我々は前節の方法で、長距離力系のモデル [5] の平衡状態の質量分布を導出しようと試みた。このモデルは後述のようにエネルギーに依って二相に分離するのだが、一様分布でない相の解析がうまくいかなかった。そこで我々は Turkington and Whittaker [6] が二次元乱流で極大エントロピーを求める際に用いた方法をもとに、新しい逐次近似法を開発した。

エントロピーが極大となるような分布関数を求める際に、ミクロカノニカル分布のもとでは質量と全エネルギーに関する拘束条件を課し、Lagrange の未定乗数を用いた汎関数 $F[f]$ の変分を取っていた。拘束条件のうち、質量は分布関数の全相空間における積分で表される。しかし全エネルギー、特にポテンシャルエネルギーについては式 (2) で示したように、分布関数に関して非線形である。このため、変分問題として取り扱うのが難しい。

そこで我々は 分布関数に対して非線形であるエネルギーの拘束条件を、線形化するようにする。具体的には逐次近似の各段階で、前段階の計算で得られた分布関数の周りで展開して線形化するという方法を用いる³。エネルギーの拘束条件を線形化するために、逐次近似の各段階ではエネルギー保存が満たされなくなってしまう。つまり、エネルギーの拘束条件は等式ではなく不等式で与えられる事になる。また、分布関数を展開して、逐次近似の次のステップで得られる分布関数は、前のステップで代入した分布関数から大きくずれないものを導出しようとしている。従来の逐次近似法では、各ステップでの分布関数に対して、このような条件は考慮されていなかった。

まず、逐次近似の方法で k 回目の計算に依って、規格化された分布関数 f_k が求まっていたとする。ここから質量密度 ρ_k と W_k が求まる。

$$\rho_k(\mathbf{x}) = \int d\mathbf{p} f_k(\mathbf{p}, \mathbf{x}), \quad (22)$$

$$W_k(\mathbf{x}) = \int d\mathbf{x}' \rho_k(\mathbf{x}') V(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \quad (23)$$

次のステップの計算で分布関数 f_k を得る際に、拘束条件を置き換える。以下のような不等式の拘

³この拘束条件の線形化こそ、我々の新しい逐次近似法のポイントである。後述する様に、線形化に依ってエントロピーの収束が保証される。

束条件が付加された，変分問題を解いて導出する．

$$\max \left\{ S[f] \left| M[f] = 1, E[f] = E[f_k] + \int \frac{\delta E}{\delta f} \Big|_{f=f_k} (f - f_k) d\mathbf{p} \, d\mathbf{x} \leq U \right. \right\}. \quad (24)$$

エネルギーの変分は以下のようになる．

$$\frac{\delta E}{\delta f} \Big|_{f=f_k} = \frac{\mathbf{p}^2}{2} + W_k(\mathbf{x}). \quad (25)$$

この変分問題は，線形化された拘束条件のもとで凹になる汎関数の極大点を求めることになる．極大点の存在などの数学的な裏付けに関しては，Appendix で述べることとする．

新しい方法では，分布関数が収束するのだろうか．ここでは収束性について考えてみる．まず Lagrange の未定乗数法を，不等式の拘束条件が課された変分問題に一般化することを考える．

$$\frac{\delta S}{\delta f} \Big|_{f=f_{k+1}} = \alpha_{k+1} + \beta_{k+1} \frac{\delta E}{\delta f} \Big|_{f=f_k}, \quad (26)$$

問題となるのはエネルギーに対する拘束条件で，ステップの前後の変数を用いて以下のようにする．

$$\beta_{k+1} \left[E[f_k] + \int \frac{\delta E}{\delta f} \Big|_{f=f_k} (f_{k+1} - f_k) d\mathbf{p} \, d\mathbf{x} - U \right] = 0. \quad (27)$$

温度は非負であるので， $\beta_{k+1} \geq 0$ である．また，質量の拘束条件にかかる α_{k+1} は質量保存の規格化から決まる．もし $\beta_{k+1} = 0$ という状況ならばエネルギー条件が外れてしまうが，これは高温極限なので普通は $\beta_{k+1} > 0$ を考える．この場合には線形化されたエネルギー拘束条件が課される．

エントロピーの収束性を示す⁴．まず，エネルギー汎関数 $E[f]$ は凹であることを示す．運動エネルギーは f に対して線形なので， $E[f]$ の f に関する二階変分は，ポテンシャルエネルギーの項から現れる．

$$\delta^2 E = \int d\mathbf{x} \, d\mathbf{x}' \delta\rho(\mathbf{x}) \delta\rho(\mathbf{x}') V(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \quad (28)$$

空間的に無限に広がった系ではなく，有限であったり周期的な境界条件が与えられる場合には，Fourier 級数展開を施して変分が次のように書き変わる．次の展開は，モデルが一辺 2π の周期的境界条件を持つ場合の展開である．

$$\delta^2 E = \sum_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}} |\delta\rho_{\mathbf{k}}|^2, \quad (29)$$

$$\widehat{\delta\rho_{\mathbf{k}}} = \frac{1}{(2\pi)^d} \int d\mathbf{x} \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) \delta\rho(\mathbf{x}), \quad (30)$$

$$\widehat{V_{\mathbf{k}}} = \frac{1}{(2\pi)^d} \int d\mathbf{x} \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) V(\mathbf{x}). \quad (31)$$

ポテンシャル V は \mathbf{x} に対して偶関数である場合には， $V_{\mathbf{k}}$ が実になる．また， $V \leq 0$ かつ V が原点から境界までで単調増加であれば，任意の \mathbf{k} に対して $V_{\mathbf{k}}$ が負になることが示される．従って (29) からエネルギー汎関数の二階変分は負であり，エネルギー汎関数が凹であることが示される．

⁴以下の議論は，逐次近似の各ステップで分布関数が大きく変化しないために，ステップ間の分布関数の違いが微小であると看做せる事により成り立っている．従来の逐次近似法では同様の議論は成り立たない．

一方、エントロピー汎関数も凹関数である。エントロピーに関しては、次の展開を考える。

$$S[f + \delta f] - S[f] = - \int dx dp \{ \delta f \log f + (f + \delta f) \log(1 + \Delta) \}. \quad (32)$$

ここで $\Delta \equiv \delta f / f$ である。エントロピーの変分は

$$\int dx dp \left. \frac{\delta S}{\delta f} \right|_f \delta f = - \int dx dp (\log f + 1) \delta f, \quad (33)$$

であるので、

$$S[f + \delta f] - S[f] = \int dx dp \left. \frac{\delta S}{\delta f} \right|_f \delta f + \int dx dp \{ \delta f - (f + \delta f) \log(1 + \Delta) \}. \quad (34)$$

と書き換えられる。ここでさらに

$$\log(1 + x) \geq x - \frac{x^2}{2}, \quad (x > -1), \quad (35)$$

を用いると、次のような書き換えが出来る。

$$S[f + \delta f] \leq S[f] + \int dx dp \left. \frac{\delta S}{\delta f} \right|_f \delta f - \frac{1}{2} \int dx dp \frac{(\delta f)^2}{f} (1 - \Delta). \quad (36)$$

$|\Delta| \ll 1$ であることを考えると

$$\frac{1}{2} \int dx dp \frac{(\delta f)^2}{f} (1 - \Delta) > 0, \quad (37)$$

となるので、

$$S[f + \delta f] \leq S[f] + \int dx dp \left. \frac{\delta S}{\delta f} \right|_f \delta f, \quad (38)$$

となる。この不等式に対して $f = f_{k+1}$, $\delta f = f_k - f_{k+1}$ を代入し、条件 (27) を用いると以下のように関係式を得る。

$$S[f_{k+1}] - S[f_k] \geq \beta_{k+1}(U - E[f_k]). \quad (39)$$

ここで α_{k+1} は質量保存のために消えている。エネルギー汎関数 $E[f]$ が凹である事を用いると、 $k \geq 1$ において

$$E[f_{k+1}] \leq E[f_k] + \int \left. \frac{\delta E}{\delta f} \right|_{f_k} (f_{k+1} - f_k) dx dp, \quad (40)$$

が成り立つ。 $\beta_{k+1} \geq 0$, $E[f_k] \leq U$ であるので、(39) が以下の関係を示す。

$$S[f_{k+1}] - S[f_k] \geq 0. \quad (41)$$

従って、エントロピーは逐次計算の二回目以降の計算で常に増加する。また一方でエントロピーには上限が存在するので、エントロピーは逐次近似の間に収束する。またエントロピーが収束するため、(39) から $E[f_k]$ が U に近づいて行く事も導出される。

さらに分布関数 f_k が平衡状態の分布関数 f に収束する事を仮定すると、未定乗数 α および $\beta \geq 0$ も収束する事を証明可能である。これらの事は、分布関数 f が変分問題 (26) を満たす事を示している。数学的には f の収束性の証明は出来ていないが、実際に我々が適用した後述のモデルにおいては、 f が収束した。

3.3 新しい逐次近似法的具体的な計算方法

それでは新しい方法を具体的にどのように計算するのかを説明する．変分問題の式 (26) から分布関数に関して次の形の式を得る．

$$f_{k+1}(\mathbf{p}, \mathbf{x}) = A_{k+1} \exp \left(-\beta_{k+1} \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2} + W_k(\mathbf{x}) \right) \right). \quad (42)$$

式の中に現れた $A_{k+1} = \exp(-\alpha_{k+1} - 1)$ と β_{k+1} は未知量とする．これらの未知量を決定しなければならない．式 (42) を全運動量で積分すると，次のようになる．

$$\rho_{k+1}(\mathbf{x}) = \tilde{A}_{k+1} \exp(-\beta_{k+1} W_k(\mathbf{x})), \quad (43)$$

$$\tilde{A}_{k+1} = \left(\frac{2\pi}{\beta_{k+1}} \right)^{d/2} A_{k+1}. \quad (44)$$

これらを用いて，(11) から

$$W_{k+1}(\mathbf{x}) = \int d\mathbf{x}' \rho_{k+1}(\mathbf{x}') V(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \quad (45)$$

が得られ，さらに全エネルギーが (5) から計算出来る．

$$E_{k+1} \equiv E[f_{k+1}] = \frac{d}{2\beta_{k+1}} + \frac{1}{2} \int \rho_{k+1}(\mathbf{x}) W_{k+1}(\mathbf{x}) d\mathbf{x}. \quad (46)$$

未定乗数 α_{k+1} は質量保存 (7) から， β_{k+1} は変更されたエネルギー拘束条件 (27) から決定されなければならない．未定乗数を数値的に求めるため，次の汎関数を定義する [7]．

$$L_k[f](\beta, \alpha) = -S[f] + \beta \left[E_k + \int \frac{\delta E}{\delta f} \Big|_{f_k} (f - f_k) d\mathbf{p} d\mathbf{x} - U \right] + \alpha(M[f] - 1). \quad (47)$$

この汎関数を用いて，次の関数を定義する．

$$L_k^*(\beta, \alpha) = \inf_f \{ L_k[f](\beta, \alpha) \}. \quad (48)$$

汎関数の中にはエントロピーに負の符号がついていることから， L_k^* の形を与える f は，式 (12) で与えられるものである．よって L_k^* に式 (42) を代入して具体的な形が与えられる．一般に L_k^* が凹関数で， α_{k+1} および β_{k+1} が L_k^* の極値を与える唯一解であることが示される [7]．

L_k^* の具体形を (12) を用いて考える．エントロピーは

$$\begin{aligned} S[f] &= - \int d\mathbf{x} d\mathbf{p} f \log f \\ &= -\tilde{A} \log \left[\tilde{A} \left(\frac{\beta}{2\pi} \right)^{d/2} \right] \int d\mathbf{x} \exp(-\beta W_k(\mathbf{x})) + \frac{\tilde{A}}{2} \int d\mathbf{x} \exp(-\beta W_k(\mathbf{x})) \\ &\quad + \beta \tilde{A} \int d\mathbf{x} W_k(\mathbf{x}) \exp(-\beta W_k(\mathbf{x})), \end{aligned} \quad (49)$$

と表される．

エネルギーの変分は

$$\left. \frac{\delta E}{\delta f} \right|_{f_k} = \frac{\mathbf{p}^2}{2} + W_k(\mathbf{x}), \quad (50)$$

なので,

$$\begin{aligned} & \int \left. \frac{\delta E}{\delta f} \right|_{f_k} f \, d\mathbf{p} \, d\mathbf{x} \\ &= \tilde{A} \int d\mathbf{x} \, W_k(\mathbf{x}) \exp(-\beta W_k(\mathbf{x})) + \frac{\tilde{A}}{2\beta} \int d\mathbf{x} \exp(-\beta W_k(\mathbf{x})), \end{aligned} \quad (51)$$

$$\begin{aligned} & \int \left. \frac{\delta E}{\delta f} \right|_{f_k} f_k \, d\mathbf{p} \, d\mathbf{x} \\ &= 2\Phi_k + \frac{d}{2\beta_k} = 2E_k - \frac{d}{2\beta_k}, \end{aligned} \quad (52)$$

となる。よって

$$\begin{aligned} & \beta \left[E_k + \int \left. \frac{\delta E}{\delta f} \right|_{f_k} (f - f_k) \, d\mathbf{p} \, d\mathbf{x} - U \right] \\ &= -\beta \left(U + E_k - \frac{d}{2\beta_k} \right) \\ & \quad + \beta \tilde{A} \int d\mathbf{x} \, W_k(\mathbf{x}) \exp(-\beta W_k(\mathbf{x})) + \frac{\tilde{A}}{2} \int d\mathbf{x} \exp(-\beta W_k(\mathbf{x})), \end{aligned} \quad (53)$$

である。最後の項については,

$$\begin{aligned} & \alpha(M[f] - 1) \\ &= - \left[\log \tilde{A} + \frac{d}{2} (\log \beta - \log(2\pi)) + 1 \right] \left(\tilde{A} \int d\mathbf{x} \exp(-\beta W_k(\mathbf{x})) - 1 \right), \end{aligned} \quad (54)$$

となるので, これらを整理すると最終的には以下の形にまとめられる。

$$L_k^*(\beta, \tilde{A}) = \log \tilde{A} + \frac{d}{2} \log \beta - \beta \left(U + E_k - \frac{d}{2\beta_k} \right) - \tilde{A} \int d\mathbf{x} \exp(-\beta W_k(\mathbf{x})). \quad (55)$$

ここでは定数項は汎関数の大小に影響しないので, 取り除いている。 L_k^* が極値を取る条件は, L_k^* の \tilde{A} および β に対する微分が 0 であることである。

$$\frac{\partial L_k^*}{\partial \tilde{A}} = \frac{1}{\tilde{A}} - \int d\mathbf{x} \exp(-\beta W_k(\mathbf{x})) = 0, \quad (56)$$

$$\frac{\partial L_k^*}{\partial \beta} = \frac{d}{2\beta} + \frac{d}{2\beta_k} - U - E_k + \tilde{A} \int d\mathbf{x} \, W_k(\mathbf{x}) \exp(-\beta W_k(\mathbf{x})) = 0. \quad (57)$$

分布関数が収束した極限で上の二つの式の意味を考えると, (56) は質量保存, (57) はエネルギー保存に対応する。(56) から

$$\tilde{A} = \int d\mathbf{x} \exp(-\beta W_k(\mathbf{x})), \quad (58)$$

となるので, (57) に代入して β を β_{k+1} に置き換えると, β_{k+1} を求める式になる。

$$-\frac{d}{2\beta_{k+1}} - \frac{d}{2\beta_k} + U + E_k - \frac{\int d\mathbf{x} \, W_k(\mathbf{x}) \exp(-\beta_{k+1} W_k(\mathbf{x}))}{\int d\mathbf{x} \exp(-\beta_{k+1} W_k(\mathbf{x}))} = 0. \quad (59)$$

L_k^* は凹関数であるので, (59) は β_{k+1} に関して唯一の解を持つ。

この逐次近似の方法で平衡状態の分布関数を求める手順は, 以下の通りである。

1. テストとして質量密度 $\rho_0(\mathbf{x})$ を考える. ρ_0 は質量保存を満たしているとする.
2. $\rho_0(\mathbf{x})$ を用いて (11) から $W_0(\mathbf{x})$ を求める.
3. (59) を β_1 について解く. 解析的には解けないので Newton 法などを用いる.
4. 次に (58) を用いて, \tilde{A}_1 を得る.
5. 最後に (43) を用いて, 質量密度 $\rho_1(\mathbf{x})$ を得る.

この操作を繰り返し, k 回目の計算で得られた $\rho_k(\mathbf{x})$ を用いて, $\rho_{k+1}(\mathbf{x})$ を求めていく. 5 ページに挙げた 従来の方法と手順が異なるところは, 3. の手順である. 従来の方法はエネルギー保存を厳密に満たすように拘束条件を用いて, β を決定していた. これに対し新しい方法では, 線形化した拘束条件を用いて β を決定している. 新しい方法では β について代数的に解が求められないので, Newton 法などによる数値解法を必要とする.

新しい方法では計算手順が増えるが, この手順の置き換えに依って結果が決定的に変わる. 逐次近似の計算で分布関数あるいは質量密度分布が収束するだけでなく, エントロピーも単調増加して収束する. また, 全エネルギーは逐次近似の計算の各段階では厳密に保存しないが, 分布関数の収束に伴って拘束条件で与えた U に収束する.

ただし, この逐次近似法は (59) に関して解の一意性を保証しているが, 最終的に収束する分布関数が一意でない場合がある. もし, あるエネルギー U で安定状態と準安定状態が両立しうる場合, 初期に与えた質量密度 ρ_0 によって, どちらの状態に対応する分布関数に収束するかが分かれてしまう. 逐次近似法で得られた分布関数が, エネルギー U に対する唯一の分布関数でない事もあり得るという注意が必要である. 新しい逐次近似法では, 逐次近似の各ステップにおいて, ステップ間の分布関数の違いは微小である事を仮定している. このために, 例えば ρ_0 に近い関数形で記述される準安定状態が存在し, それとは別に安定状態が存在した場合には, 逐次近似法で得られた分布関数は準安定状態のものになる可能性が高い. だが逐次近似法による分布関数の導出を注意深く行う事により, 準安定状態の存在とその分布関数を発見出来るという利点も存在する.

3.4 新しい逐次近似法の有用性

新たに提案した逐次近似法は, どれほど有用なものだろうか. ここでは例として, 次のようなモデルについて考える.

一次元の円環に粒子が固定されていて, その粒子が三次元の Newton 重力ポテンシャルによって互いに相互作用を及ぼすモデル [5] を扱う. このモデルは SGR モデルと名付けられている. SGR モデルのハミルトニアンは, N 粒子系で考える場合には以下のように与えられる.

$$H = \frac{1}{2} \sum_i p_i^2 + \frac{1}{2N} \sum_{i,j} V_\epsilon(\theta_i - \theta_j), \quad (60)$$

$$V_\epsilon(\theta_i - \theta_j) = -\frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{1 - \cos(\theta_i - \theta_j) + \epsilon}}. \quad (61)$$

ε はソフトニングパラメーターで、粒子間の距離が非常に小さくなった時にポテンシャルの発散を防ぐために導入した。

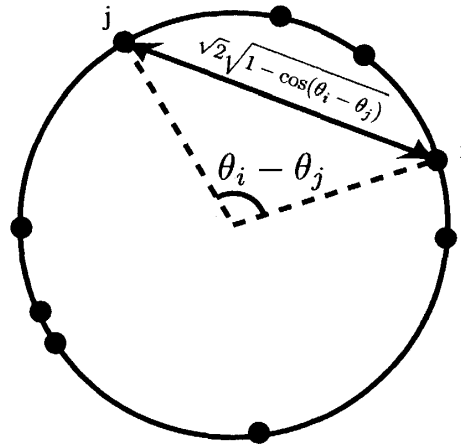


図 1: SGR モデル. 粒子は円環に固定されており、空間座標は角度 θ で表される. θ_i と θ_j に存在する粒子対は、粒子が張る弦の長さに反比例するポテンシャルの力を及ぼし合う. 力は円環の接線方向にのみ働く.

このモデルは過去の解析から、熱力学的性質は ε に大きく依存する事が分かっている [1, 5]. 系の全エネルギーに依って、相が三つに分類される.

1. 低エネルギーでクラスターを一個形成する相
2. 中間状態の相. この相ではエネルギーを増加させると温度が下がる, 負の比熱が存在する.
3. 高エネルギーで一様分布になる相

そしてミクロカノニカル分布では、中間状態と高エネルギーの一様分布の相との間で相転移を起こす. 相転移の次数も ε の値に依存し, $\varepsilon < 10^{-4}$ では一次相転移, $\varepsilon > 10^{-4}$ では二次相転移になる. また, $\varepsilon > 10^{-2}$ では中間状態の相が消える.

このモデルは長距離に力が及ぶ事, また近接すると力が急激に大きくなる事などから, 多粒子系のシミュレーションでは精度良く計算を行うのに時間がかかる. また, 特に相転移点付近では揺らぎが大きいために, 熱力学的性質をシミュレーションから見いだす事が非常に困難であった.

逐次近似法で SGR モデルの解析を試みしてみる. 計算のテストとして, 一次相転移を引き起こす $\varepsilon = 10^{-5}$ とした. また, 全エネルギーは相転移点に近い $U = -1$ とした. この比較の結果は図 2 に示すようで, 従来の逐次近似法では 100 回計算しても解が収束しない. 一方, 新しい逐次近似法では, 10 回前後の計算で解が収束した. この図からも, 新しい方法が極めて強力な方法である事が分かる.

また, 新たな逐次近似法はミクロカノニカル分布のもとで導出した方法であるが, カノニカル分布での臨界エネルギーおよび臨界温度を求める事も可能である. $\varepsilon = 10^{-5}$ とした場合の SGR モデルの温度曲線とエントロピー曲線を図 3 で示す. エントロピー曲線 (b) は $U_{top} < U < U_c$ で

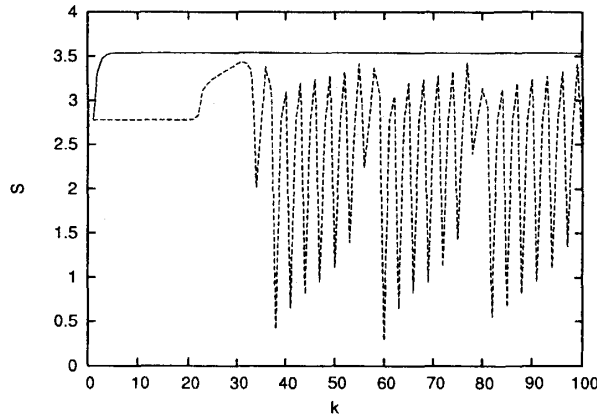


図 2: 二つの逐次近似法による SGR モデルの解析. パラメーターは $\varepsilon = 10^{-5}$, $U = -1$ とした. このグラフは横軸が逐次計算の回数, 縦軸がエントロピーを表している. 実線は新しい方法での結果で, エントロピーは単調に増加し 10 回前後で収束する. 一方, 破線は従来の方法によるもので, エントロピーは振動し続けて 100 回の計算でも収束しない.

下に凸になる. このため, エントロピー曲線に $U = U_{low}, U_{high}$ を接点とした共通接線を引く事が出来る. この接点が, カノニカル分布での臨界エネルギーに対応する. また, 共通接線の傾きの逆数が, カノニカル分布の臨界温度に対応する.

4 計算を高速化する手法

逐次近似法では積分がしばしば現れるが, 解析的に計算出来る事ではなく数値積分を用いる事になる. 数値積分は台形公式, あるいは精度を上げた Simpson の公式などの方法でなされるが, たとえば空間のグリッド数を N とすると, ポテンシャルエネルギーの計算は $O(N^2)$, 他の量は $O(N)$ の計算が必要となる. また, $W(\mathbf{x})$ の計算も各々のグリッドで $O(N)$ の計算が必要であるので, 全グリッドでの計算は $O(N^2)$ になる. ポテンシャルエネルギー, $W(\mathbf{x})$ の計算は空間次元が高くなると膨大なものとなり, 現実的にモデルの解析が不可能になってしまう. ところが, モデルに依ってはこの計算を大きく減らせる場合がある.

4.1 平均場近似が使える場合

まず, 計算量が非常に少なく出来る場合を考える. 周期的な境界条件が与えられた一次元モデルで, HMF モデルを考える [4].

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2} + \frac{1}{2N} \sum_{i,j=1}^N [1 - \cos(\theta_i - \theta_j)]. \quad (62)$$

このモデルはポテンシャルが二粒子間の座標変数の差の \cos で与えられる長距離力系である. ポテンシャルエネルギーを計算する場合には i, j 各々の足し上げが必要であるように見えるが, 以

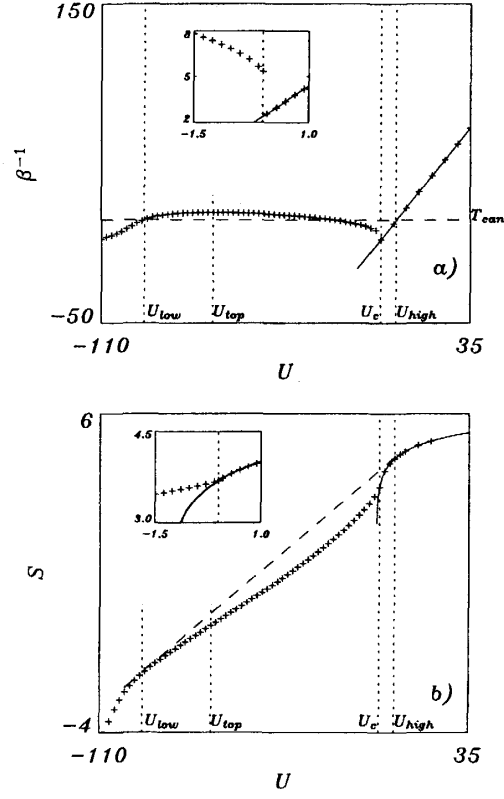


図 3: $\varepsilon = 10^{-5}$ の場合の, SGR モデルの温度曲線 (a) とエントロピー曲線 (b). 図中の U_{top} は比熱の符号が変わるエネルギーで $U_{top} \simeq -66$ である. $U_c \simeq 0$ はマイクロカノニカル分布の臨界エネルギーを表す. $U = U_c$ では (a) で曲線が不連続になっている事, (b) で曲線が滑らかでない接続をしている事から, この SGR モデルは $U = U_c$ で一次相転移を引き起こす事が分かる. 一方, エントロピー曲線 (b) の共通接線から, 臨界エネルギー $U_{low} \simeq -93$, $U_{high} \simeq 6$ が分かる. この時の相転移温度は $T_{can} \simeq 15$ である. 図中の実線は, 一様分布の時の温度とエントロピーを解析的に求めて記述したものである.

下のような変形が出来る.

$$\begin{aligned}
 & \sum_{i,j=1}^N [1 - \cos(\theta_i - \theta_j)] \\
 &= N^2 - \sum_{i,j=1}^N \cos(\theta_i - \theta_j) \\
 &= N^2 - \sum_{i,j=1}^N [\cos \theta_i \cos \theta_j + \sin \theta_i \sin \theta_j] \\
 &= N^2 - \left[\left(\sum_{i=1}^N \cos \theta_i \right) \left(\sum_{j=1}^N \cos \theta_j \right) + \left(\sum_{i=1}^N \sin \theta_i \right) \left(\sum_{j=1}^N \sin \theta_j \right) \right]. \quad (63)
 \end{aligned}$$

ここで

$$M_1 \equiv \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \cos \theta_i, \quad (64)$$

$$M_2 \equiv \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sin \theta_i, \quad (65)$$

という平均場を定義すると、(63) は次のように書き換えられる。

$$\sum_{i,j=1}^N [1 - \cos(\theta_i - \theta_j)] = N^2 (1 - M_1^2 - M_2^2). \quad (66)$$

つまり、もともとは $O(N^2)$ の計算が必要だったポテンシャルエネルギーが、 $O(N)$ の計算で求まる平均場で厳密に記述出来てしまうという事である。

HMF モデルに新しい逐次近似法を適用して、熱力学的性質を解析する場合には以下のような⁵。関数 $W(\mathbf{x})$ の定義式 (11) について考えると、

$$\begin{aligned} W(\theta) &= \int_0^{2\pi} \rho(\phi) V(\theta - \phi) d\phi \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \rho(\phi) [1 - \cos(\theta - \phi)] d\phi \\ &= \frac{1}{2\pi} \left\{ 2\pi - \int_0^{2\pi} \rho(\phi) (\cos \theta \cos \phi + \sin \theta \sin \phi) d\phi \right\}, \end{aligned} \quad (67)$$

ここで前述のように平均場を定義する。

$$\widetilde{M}_1 \equiv \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \rho(\phi) \cos \phi d\phi, \quad (68)$$

$$\widetilde{M}_2 \equiv \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \rho(\phi) \sin \phi d\phi. \quad (69)$$

すると (67) は積分操作が外れる。

$$W(\theta) = 1 - \widetilde{M}_1 \cos \theta - \widetilde{M}_2 \sin \theta. \quad (70)$$

このため数値積分を考えた場合には、各グリッドで $W(\theta)$ を求める操作の手順が $O(N^2)$ から $O(N)$ に減らされる。ここでは非常に簡単な HMF モデルの例を示したが、一般に座標変数の差の Fourier 級数展開でポテンシャルを記述する事が出来る場合、三角関数の分解を用いることができる。それゆえ、平均場を用いてポテンシャルや力を厳密に記述する事が出来、計算量を劇的に減らす事が出来る。ただし、Fourier 級数展開でポテンシャルを展開した時に、展開係数が波数に対して急激に減少しない場合には、数多くの項を拾い上げなければならないので、計算量が減るとは限らない事に注意が必要である。

⁵HMF モデルの熱力学的性質は解析的に調べられているが、ここでは後述するような HMF モデルの拡張の場合にも適用出来る場合を考慮して解説する。

4.2 周期的境界条件が与えられている場合

前節では平均場でポテンシャルが厳密に記述出来る場合を扱った。しかしこのようなモデルはごく限られたものである。そこでより一般的な場合に適用出来る方法を考える。

モデルは周期的境界条件が与えられているとする。 簡単のため、モデルはどの方向にも 2π で一周期となるようにする。周期的境界条件が与えられている場合、ポテンシャルの計算を以下のよう改良出来る。ここでは (11) に着目する。(11) の両辺を Fourier 変換する。

$$\widehat{W}(\mathbf{k}) = \widehat{\rho}(\mathbf{k}) \widehat{V}(\mathbf{k}). \quad (71)$$

Fourier 変換によって、(11) のたたみ込み積分が関数の積に置き換わる。 $\widehat{\rho}(\mathbf{k})$ と $\widehat{V}(\mathbf{k})$ はそれぞれ、以下のように計算する。

$$\widehat{\rho}(\mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int d\mathbf{x} \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) \rho(\mathbf{x}), \quad (72)$$

$$\widehat{V}(\mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int d\mathbf{x} \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) V(\mathbf{x}). \quad (73)$$

また、これらの積で得られた $\widehat{W}(\mathbf{k})$ から $W(\mathbf{x})$ は次のように Fourier 逆変換で求める。

$$W(\mathbf{x}) = \int d\mathbf{k} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) \widehat{W}(\mathbf{k}). \quad (74)$$

これらの Fourier 変換および逆変換について、高速フーリエ変換 (FFT) を用いる事により、計算を高速化出来る。FFT ではグリッド数 N の Fourier 変換の計算量が $O(N^2)$ から $O(N \log N)$ に減らせるため、ポテンシャルの計算量も $O(N^2)$ から $O(N \log N)$ に減らす事が出来る。

FFT を用いる事が出来るのは、空間のグリッド間隔が等間隔で、かつ一辺のグリッド数が 2 の冪乗になっている場合である。

$O(N^2)$ から $O(N \log N)$ に計算量が減らせる効果は非常に大きい。例えば前述の SGR モデルの解析で $N = 8192$ のグリッドを使った場合に、Pentium4 3GHz を使用した PC での解析で、一般的な手法だと 2 日ほどかかった解析が、FFT の適用でわずか数分で終わった。

5 多次元モデルでの解析

我々は Newton 重力を模した SGR モデルの熱力学的性質を解析するため、新しい逐次近似法を用いた [1]。他にもいくつかのテストを行ったが、空間一次元モデルばかりであった。そこで多次元になった場合も問題なく解析が出来るかどうかを調べる事とする。

ここでは HMF モデルを二次元に拡張したモデルを解析してみる [8]。ハミルトニアンは以下のよう与えられる。

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2} + \frac{1}{2N} \sum_{i,j}^N \{3 - \cos(x_i - x_j) - \cos(y_i - y_j) - \cos(x_i - x_j) \cos(y_i - y_j)\}. \quad (75)$$

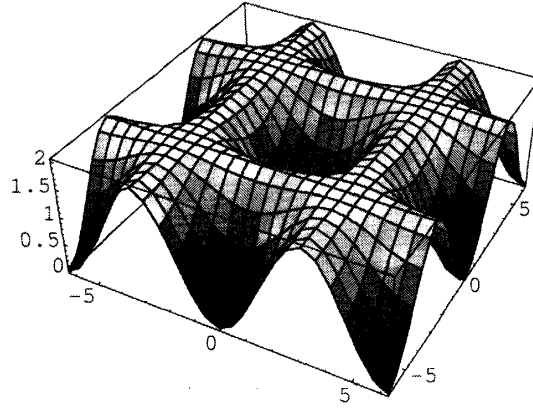


図 4: 二次元モデルのポテンシャル. x 方向, y 方向とも周期 2π の周期的境界条件が課されている. 原点がポテンシャル最小で, $x = \pm\pi$ または $y = \pm\pi$ が最大となる.

この二次元モデルのポテンシャルは図 4 の様な形をしている.

二次元モデルの場合にも, 平均場を定義する.

$$\mathbf{M}_1 = (\langle \cos(x) \rangle_N, \langle \sin(x) \rangle_N) = M_1 (\cos(\phi_1), \sin(\phi_1)), \quad (76)$$

$$\mathbf{M}_2 = (\langle \cos(y) \rangle_N, \langle \sin(y) \rangle_N) = M_2 (\cos(\phi_2), \sin(\phi_2)), \quad (77)$$

$$\mathbf{P}_1 = (\langle \cos(x+y) \rangle_N, \langle \sin(x+y) \rangle_N) = P_1 (\cos(\psi_1), \sin(\psi_1)), \quad (78)$$

$$\mathbf{P}_2 = (\langle \cos(x-y) \rangle_N, \langle \sin(x-y) \rangle_N) = P_2 (\cos(\psi_2), \sin(\psi_2)), \quad (79)$$

$$M_1 \equiv |\mathbf{M}_1|, M_2 \equiv |\mathbf{M}_2|, P_1 \equiv |\mathbf{P}_1|, P_2 \equiv |\mathbf{P}_2|,$$

$\langle \cdot \rangle_N$ は全粒子での平均量, ϕ_i, ψ_i ($i = 1, 2$) は偏角を表す. 平均場を用いる事により, ハミルトニアンを次のように書き換える事が出来る.

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2} + N \left(\frac{3}{2} - |\mathbf{M}_1|^2 - |\mathbf{M}_2|^2 - \mathbf{P}_1 \cdot \mathbf{P}_2 \right). \quad (80)$$

$N \rightarrow \infty$ の連続極限で, この二次元モデルの熱力学的性質を解析する. 既に過去の解析 [8, 9] において, $1.8 \leq U \leq 2$ で負の比熱が現れる事が分かっている. そしてこのモデルは $U \simeq 2$ で相転移を起こす事が, カノニカル分布からの平衡状態に対する予測がなされている [9].

まず, 逐次近似法が二次元モデルでも有効に働くかを調べてみる. 図 5 は二次元モデルに新たな逐次近似法を適用した場合の, 計算回数とエントロピーの関係を示している. 二次元モデルでもやはりエントロピーが単調増加しながら直ちに収束する事が分かる. つまり, 逐次近似法は次元を上げてても有用なものであるという事が示された.

このモデルは全エネルギーが低い時にはクラスターを形成し, 高い時には一様分布になる. 質量分布が一様であるとき, ポテンシャルエネルギーは $\Phi_{hom} = 1.5$ になる. よって高エネルギーの場合には, 系の温度は

$$T = \beta^{-1} = U - 1.5. \quad (81)$$

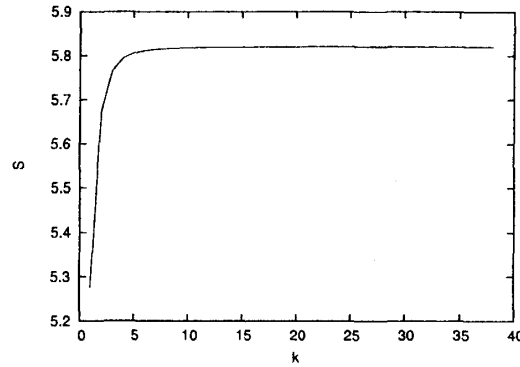


図 5: 二次元モデルで, $U = 2.000$ とした場合の逐次近似法. 横軸は逐次計算の回数, 縦軸はエントロピーを表す. 新たな逐次近似法は空間次元を上げてでも有効である事がわかる.

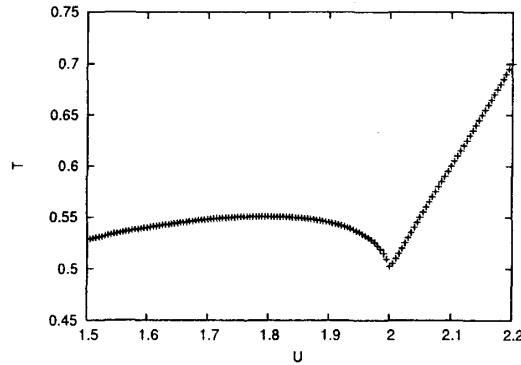


図 6: 逐次近似法で得られた温度曲線. ここでは臨界エネルギー付近のみを拡大して示した. 比熱は $U = U_{top} = 1.795$ で符号が反転し, $U = U_c = 2.000$ で二次相転移を起こす事が明らかになった. この解析は過去の解析 [8, 9] とほぼ一致する.

になる.

ミクロカノニカル分布において, 系は $U_c = 2.000$ で二次相転移を起こす (図 6). そして, 負の比熱は $U_{top} = 1.795$ から $U = U_c$ の間で現れる. $U = U_{top}$ での温度は $T = \beta^{-1} \simeq 0.5508$ である. これらの結果は過去の解析 [9] とほぼ一致している.

それでは, カノニカル分布での相転移はどうだろうか. 前述のようにカノニカル分布での相転移は, エントロピーの共通接線から臨界エネルギーと臨界温度を求める事で調べられる. 二次元モデルの場合にはエントロピー曲線と共通接線の違いが非常に小さいので, 図 7 では共通接線とエントロピーの差を示す. この解析から, 臨界エネルギーが $U_{low} = 1.6160$ と $U_{high} = 2.0413$ であること, そして臨界温度が $T_c = 0.54137$ であることがわかる.

以上のように, 空間二次元のモデルでも平衡状態の分布関数を導出する事が可能であった. この手法はさらに空間三次元モデルへの拡張も原理的には可能であると期待出来る⁶.

⁶解像度にも大きく依存するが, 空間三次元以上のモデルの解析は大規模な計算機システムが必要と予想される.

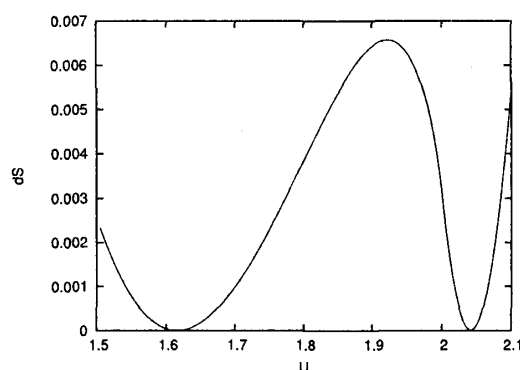


図 7: 二次元モデルにおけるカノニカル分布のもとでの相転移. 共通接線とエントロピー曲線の差を示す. 接点は $U = 1.6160, 2.0413$ であり, これはカノニカル分布での臨界エネルギーを表す.

6 まとめ

我々は拘束条件を一点分布関数に対して線形化し, 不等式の拘束条件を与える事に依って, 分布関数を高速に求める新たな逐次近似法を開発した. この逐次近似法を用いる事により, 従来はゆらぎが大きいために解析が非常に困難であった, 相転移点付近の系の振る舞いを詳細に調査する事が可能となった. 本文でも示したように, ミクロカノニカル分布の仮定の下で, 系の相転移は一次か二次か, 比熱の符号が反転するエネルギーはいくつか, 準安定状態は存在するのかといった, 熱力学的性質を明らかに出来た. また, 得られたエントロピー曲線の共通接線を求める事により, カノニカル分布での臨界エネルギーと臨界温度を精密に求める事も可能となった.

ではこの逐次近似法の手法は万能であるだろうか. 残念ながら現在のところは, どのような系に対しても適用可能という訳ではなく, いくつか解決しなければならない問題がある. 例えば, 逐次近似の各段階では主に数値積分を行っている. ポテンシャルエネルギーの数値積分を行う場合, 例えば Newton 重力のようにポテンシャルが原点で発散するような系は, 数値積分が発散する. また, 開放系で長距離力である場合には, 積分範囲を無限に取りなければならないくなり, 計算が出来なくなってしまう. Newton 重力に対しては, ポテンシャルが無限遠で漸近的に平坦になるが故に, 大きな運動エネルギーを持った粒子が無限遠に逃げていくという, 『蒸発』が見られる [2]. この蒸発を防ぐために, 系全体を剛体壁で囲むことを考える. すると今度は, 自己重力系は系の全エネルギーを増加させると温度が低下する『負の比熱』の存在のために問題が生じる. 系の中心部に出来たクラスターから粒子が脱出すると, 脱出した運動エネルギーの分だけクラスターはエネルギーを失い, 温度が上昇する. この繰り返しにより, 中心部は温度が発散して系が破綻する, 『重力熱不安定』を引き起こす [10, 11, 12]. Newton 重力に限らずとも, 上記のようにポテンシャルが発散したり, 無限遠で力が漸近的にゼロになる系では, 我々の方法を応用する事が出来ない.

また現実的な問題として, 空間三次元モデルにおいて周期的境界条件が与えられていない系では計算量が膨大になる. ポテンシャルの変化が大きい場合には数値積分のグリッドを細かく取らなければならない, 計算時間およびメモリの面から解析が非常に難しい.

だがこれらの問題を別にすれば、やはり系の熱力学的性質を解明する手段として、我々が開発した逐次近似法は強力なものであるといえる。この方法の応用として、様々な系の相転移現象や準安定状態の有無の解析などがなされるだろう。空間次元と相転移の性質の関係も明らかにすることができる。また、多体系のシミュレーションとの比較から、系が緩和に至る段階を解析する事も期待出来る。本方法を用いて、系の平衡状態に関する解析が進展すれば幸いである。

不等式の拘束条件が課された変分問題

我々が開発した逐次近似法では、エネルギー拘束条件を分布関数に関して線形化し、不等式の拘束条件を与えている。この場合の未定乗数法は、等式で拘束条件が課された場合の未定乗数法といくらか異なるので注意が必要である。以下、拘束条件が不等式で課された場合の Lagrange の未定乗数法について考えていく [13]⁷。

以下、数学的な記述で説明していく。文中の式や変数と、逐次近似法で取り扱っている物理量や拘束条件などとの対応は、最後に示す事とする。

まず実変数ベクトル \mathbf{x} を考える。拘束条件が複数存在し、これらが

$$g_i(\mathbf{x}) \leq c_i \quad (j = 1, \dots, m), \quad (82)$$

で与えられるとする。この条件の下で $F(\mathbf{x})$ の最大値を求める事を考えて、Lagrange の未定乗数を導入する。

$$\hat{F}(\mathbf{x}, \mathbf{w}) = F(\mathbf{x}) + \sum_{j=1}^m w_j (c_j - g_j(\mathbf{x})). \quad (83)$$

このような \hat{F} に対し、次の定理が成り立つ。

定理 1 次の条件を満たす \mathbf{x}^* , \mathbf{w}^* が存在するならば、 $\mathbf{x} = \mathbf{x}^*$ は条件 (82) のもとでの条件付き最大化問題の解を与える。

$$\hat{F}(\mathbf{x}^*, \mathbf{w}^*) = \max_{\mathbf{x}} \hat{F}(\mathbf{x}, \mathbf{w}^*), \quad (84)$$

$$g_j(\mathbf{x}^*) \leq c_j \quad (j = 1, \dots, m), \quad (85)$$

$$w_j^* \geq 0 \quad (j = 1, \dots, m),$$

$$w_j^* (c_j - g_j(\mathbf{x}^*)) = 0 \quad (j = 1, \dots, m).$$

解 $\mathbf{x} = \mathbf{x}^*$ が存在する時に、この \mathbf{x}^* に対応する \mathbf{w}^* の存在が必ずしも保証されている訳ではないが、次のことがいえる。 $\mathbf{x} = \mathbf{x}^*$ が \hat{F} の最大値を与えるので、

$$\left. \frac{\partial \hat{F}}{\partial x_i} \right|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}^*} = \left. \frac{\partial F}{\partial x_i} \right|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}^*} - \sum_j w_j^* \left. \frac{\partial g_j}{\partial x_i} \right|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}^*} = 0 \quad (i = 1, \dots, n), \quad (86)$$

である。そして、この場合に

$$g_j(\mathbf{x}^*) \leq c_j, \quad w_j^* \geq 0 \quad (j = 1, \dots, m),$$

$$w_j^* (c_j - g_j(\mathbf{x}^*)) = 0 \quad (j = 1, \dots, m), \quad (87)$$

となる \mathbf{w}^* が存在する。

一方で拘束条件について、次のような定理が成り立つ。

⁷ここでの解説は [13] に沿っているので、証明などの詳細は [13] を参照のこと。

定理 2 条件付き最大化問題の解 $\mathbf{x} = \mathbf{x}^*$ において, 行列

$$\left\{ \frac{\partial g_j}{\partial x_i}, i = 1, \dots, n; j = 1, \dots, m \right\}$$

の階数が m ならば, (87) を満たす \mathbf{w}^* が存在する.

拘束条件が不等式である場合には, 条件式の数が増える数より多くなってしまう事があり得る. この場合には, 上記の Jacobi 行列の階数条件が成立しなくなってしまうが, 若干の書き換えをすれば定理が成り立つようになる.

定理 2a 条件 $g_j(x_1, \dots, x_n) \leq c_j$ ($j = 1, \dots, m$) のもとで $F(x_1, \dots, x_n)$ の最大値を与える解を $\mathbf{x} = \mathbf{x}^*$ とする. このとき,

$$g_j(x_1^*, \dots, x_n^*) = c_j, \quad (88)$$

となる j の集合を I とし, その大きさ (要素の数) を r とする. もし $r \times n$ の Jacobi 行列

$$\left\{ \frac{\partial g_j}{\partial x_i}, j \in I \right\}$$

の階数が r に等しければ, $\mathbf{w}^* = (w_1^*, \dots, w_m^*)$ が存在して, 全ての j について $w_j^* \geq 0$ かつ $j \in I$ ならば $w_j^* = 0$ となる. また,

$$\frac{\partial F}{\partial x_i} - \sum_j w_j^* \frac{\partial g_j}{\partial x_i} = 0, \quad (89)$$

となる.

次に凹関数について考える. 関数 F が凹 (concave) 関数であるとは, 全ての $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2$, $0 < \alpha < 1$ に対して

$$F(\alpha \mathbf{x}_1 + (1 - \alpha) \mathbf{x}_2) \geq \alpha F(\mathbf{x}_1) + (1 - \alpha) F(\mathbf{x}_2), \quad (90)$$

となることである. また, 不等号が常に成り立つ時は, 厳密に凹 (strictly concave) であるという. 凸は不等号が逆の場合をいう.

凹関数について, 次の事がいえる. まず, F を凹関数とする. \mathbf{x} と F の定義域の内点 \mathbf{a} を選び, 負でない実数 t を取る. これらに対して,

$$g_t(\mathbf{x}, \mathbf{a}) = \frac{1}{t} (F(\mathbf{x} + t\mathbf{a}) - F(\mathbf{x})), \quad (91)$$

と置くと, F が凹ならば $g_t(\mathbf{x}, \mathbf{a})$ は t に対して単調非増加になる. 従って, t を正の方向から近づけた極限が存在する. これを F の \mathbf{x} における \mathbf{a} 方向への微係数と呼ぶ事にし,

$$\nabla F(\mathbf{x}, \mathbf{a}) \equiv \lim_{t \rightarrow +0} g_t(\mathbf{x}, \mathbf{a}), \quad (92)$$

と表す事にする. この微係数に対して, 次の定理が成り立つ.

定理 3 凹関数 F が与えられた範囲 C の内点 $\mathbf{x} = \mathbf{x}^*$ で最大値を取るための必要十分条件は, 全ての \mathbf{a} に対して

$$\nabla F(\mathbf{x}^*, \mathbf{a}) \leq 0,$$

となる事である。そしてもし F が連続で一階微分可能であるならば,

$$\nabla F(\mathbf{x}, \mathbf{a}) = \mathbf{a} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}}$$

と出来るので, $\mathbf{x} = \mathbf{x}^*$ が最大値を与える必要十分条件は, \mathbf{x}^* が定義域の内点で

$$\left. \frac{\partial F}{\partial \mathbf{x}} \right|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}^*} = \mathbf{0},$$

となる事である。

次に条件 $g_j(\mathbf{x}) \leq c_j$ について考える。もし g_j が凸ならば, 条件を満たす範囲は凸集合となる。そして, $w_i \leq 0$ ($i = 1, \dots, m$) とすると,

$$\hat{F}(\mathbf{x}, \mathbf{w}) = F(\mathbf{x}) + \sum_j w_j^*(c_j - g_j(\mathbf{x})),$$

は凹関数となるから, 定理 2a と定理 3 を組み合わせて, 次の事が導かれる。

定理 4 F が凹, g_j が凸関数のとき, $\mathbf{x} = \mathbf{x}^*$ が条件

$$g_j(\mathbf{x}) \leq c_j \quad (j = 1, \dots, m),$$

のもとで $F(\mathbf{x})$ を最大とする解となる必要十分条件は, F, g_j が連続微分可能である事。そして $\mathbf{x} = \mathbf{x}^*$ における g_j の Jacobi 行列の階数が r に等しいとき,

$$\begin{aligned} \hat{F}(\mathbf{x}, \mathbf{w}^*) &= \max_{\mathbf{x}} F(\mathbf{x}, \mathbf{w}^*), \\ g_j(\mathbf{x}^*) &\leq c_j, \\ w_j^* &\geq 0, \\ w_j^*(c_j - g_j^*(\mathbf{x}^*)) &= 0 \quad (j = 1, \dots, m), \end{aligned}$$

となる \mathbf{w}^* が存在する事である。

実は F の微分可能性は必要ではなく, さらに g_j の微分可能性も不要である。これらを考慮して, 次の定理が存在する。

定理 5 (Kuhn-Tucker の定理) F が凹, g_j が凸関数, C が凸集合のとき, 条件

$$g_j(\mathbf{x}) \leq c_j, \quad (j = 1, \dots, m), \quad \mathbf{x} \in C,$$

で F を最大にする解を $\mathbf{x} = \mathbf{x}^*$ とする。もし $g_j(\mathbf{x}_0) < c_j$ ($j = 1, \dots, m$) となるような $\mathbf{x}_0 \in C$ が存在するならば, 定理 4 の条件を満たす \mathbf{w}^* が存在する。

この Kuhn-Tucker の定理から, 不等式の拘束条件が課された変分問題でも, Lagrange の未定乗数の存在が証明される。

我々が開発した逐次近似法では、変数 \mathbf{x} に対応するものは分布関数で、成分は一つである。その他の量は以下のような対応付けがなされる。

$$F \rightarrow -L, \quad (93)$$

$$c_j \rightarrow U, \quad (94)$$

$$g_j \rightarrow E[f_k] + \int \frac{\delta E}{\delta f} \Big|_{f_k} (f_{k+1} - f_k) d\mathbf{p} d\mathbf{x}, \quad (95)$$

$$w_j \rightarrow \beta. \quad (96)$$

謝辞

オリジナルの論文 [1] で提案した逐次近似法は、空間一次元モデルでの解析にのみ有効なものだったため、その多次元版の拡張はニース・ソフィアアンティポリス非線形機関の Freddy Bouchet 博士、リヨン高等師範学校の Thierry Dauxois 博士、フィレンツェ大学の Stefano Ruffo 教授との議論で行う事が出来ました。

また逐次近似法の適用に関して、早稲田大学の前田恵一教授、お茶の水女子大学の森川雅博教授、曾田康秀博士、井口修博士、ぐんま天文台の中道晶香博士との有用な議論と助言が参考になりました。

早稲田高等学院の原光一郎博士は、本稿に注意深く目を通し、エントロピーの収束に関する証明の不備など、数々の誤りを指摘して下さいました。森川雅博教授は、本稿の構成に関する有用な意見を下さいました。

空間二次元以上の多次元のモデルの解析には、東京大学物性研究所スーパーコンピュータシステムのシステム A を利用しております。

これらの方々、団体に感謝したいと思います。

参考文献

- [1] T. Tatekawa, F. Bouchet, T. Dauxois, and S. Ruffo, Phys. Rev. **E71** (2005), 056111.
- [2] S. Chandrasekhar, *Principles of Stellar Dynamics* (Princeton University Press, Princeton, NJ) (1942).
- [3] J. Binney and S. Tremaine, *Galactic Dynamics* (Princeton University Press, Princeton, NJ) (1987).
- [4] M. Antoni and S. Ruffo, Phys. Rev. **E52** (1995), 2361.
- [5] Y. Sota, O. Iguchi, M. Morikawa, T. Tatekawa, and K. Maeda, Phys. Rev. **E64** (2001), 056133.

- [6] B. Turkington and N. Whitaker, SIAM J. Sci. Comp. **17** (1996), 1414.
- [7] R. T. Rockafellar, *Convex Analysis* (Princeton University Press, Princeton, NJ) (1970).
- [8] M. Antoni and A. Torcini, Phys. Rev. **E57** (1998), R6233.
- [9] A. Torcini and M. Antoni, Phys. Rev. **E59** (1999), 2746.
- [10] V. A. Antonov, Vestnik Leningrad Univ. **7** (1962), 135.
- [11] D. Lynden-Bell and R. Wood, Mon. Not. R. Astron. Soc. **138** (1968), 495.
- [12] T. Padmanabhan, Astrophys. J. Supp. **71** (1989), 651.
- [13] 竹内啓, 岩波講座 応用数学 [対象 9] 『社会科学における数理的方法』(岩波書店) (1995).